

## ABSTRAK

### STUDI KOMPUASI PEMISAHAN ENANSIOMER SENYAWA PPI (*PROTON PUMP INHIBITOR*) DENGAN HIDROKSIPROPIL- $\beta$ - SIKLODEKSTRIN

Telah dilakukan studi komputasi kompleks inklusi pada empat senyawa PPI yaitu : Lansoprazol (lnz), Omeprazol (omz), Pantoprazol (pnz) dan Rabeprazol (rbz) dengan hidroksipropil- $\beta$ -siklodekstrin (hp-cyd) dan ketiga bentuk dimernya (*head to head*, *head to tail* dan *tail to tail*) menggunakan metode kuantum semiempirik PM3. Hasil studi komputasi menunjukkan bahwa nilai keseluruhan energi ikat kompleks R-lnz lebih rendah dibandingkan nilai keseluruhan energi ikat kompleks S-lnz, nilai keseluruhan energi ikat kompleks R-omz lebih rendah dibandingkan nilai keseluruhan energi ikat kompleks S-omz, nilai keseluruhan energi ikat kompleks S-pnz lebih rendah dibandingkan nilai keseluruhan energi ikat kompleks R-pnz, dan nilai keseluruhan energi ikat kompleks R-rbz lebih rendah dibandingkan nilai keseluruhan energi ikat kompleks S-rbz, yang mengindikasikan bahwa kompleks inklusi R-lnz lebih stabil jika dibandingkan dengan kompleks inklusi S-lnz, kompleks inklusi R-omz lebih stabil jika dibandingkan dengan kompleks inklusi S-omz, kompleks inklusi S-pnz lebih stabil jika dibandingkan dengan kompleks inklusi R-pnz, dan kompleks inklusi R-rbz lebih stabil jika dibandingkan dengan kompleks inklusi S-rbz.

Kata-kata kunci: studi komputasi; semiempirik; PM3; kompleks inklusi; PPI; hidroksipropil- $\beta$ -siklodekstrin.

## ABSTRACT

### **COMPUTATIONAL STUDY OF ENANSIOMER SEPARATION OF PPI (PROTON PUMP INHIBITOR) WITH HYDROXYPROPYL- $\beta$ -CYCLODEXTRIN**

*Computational study on the inclusion complex between four compound PPI, i.e. : Lansoprazol (lnz), Omeprazol (omz), Pantoprazol (pnz) and Rabeprazol (rbz) with hydroxypropyl- $\beta$ -cyclodextrin (hp-cyd) and all three of the dimers (head to head, head to tail and tail to tail) were simulated using quantum semi-empirical PM3 method. The computational study results showed that the overall of the binding energy of R-lnz complex is higher than S-lnz complex, the overall of the binding energy of R-omz complex is higher than S-omz complex, the overall of the binding energy of S-pnz complex is higher than R-pnz complex and the overall of the binding energy of R-rbz complex is higher than S-rbz complex, indicated that R-lnz complex is more stable than S-lnz complex, R-omz complex is more stable than S-omz complex, S-pnz complex is more stable than R-pnz complex, and R-rbz complex is more stable than S-rbz complex.*

*Keywords: computational study; semiempiric; PM3; inclusion complex; PPI; hydroxypropyl- $\beta$ -cyclodextrin.*

